

ARTIKEL

Investigasi Senyawa Aktif 2,5-Bornadienol dari Tanaman Jahe (*Zingiber Officinale*) dengan Protease Sarscov-2 Varian 7B62

Harissandi Muhammad Nasir^a, Hanifah Putri Indah^b

^aDepartment of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Institut Pertanian Bogor, Bogor, Indonesia.

^bDepartment of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia.

*Corresponding email: hanifahputrii@gmail.com

ABSTRAK

Studi ini bertujuan untuk menganalisis interaksi senyawa aktif 2,5-Bornadienol dari tanaman Jahe (*Zingiber Officinale*) dengan protease Sars-Cov-2 varian 7B62. Metode permodelan dan komputasi menggunakan PyMOL versi 2.5.2 dan PyRx versi 0.8 (python.exe) 32 Bit. Screening molekul aktif menggunakan situs <http://www.phytochem.nal.usda.gov/> dan senyawa aktif nya didapatkan dari pubchem (www.pubchem.com). Kajian ini dilakukan dengan mengobservasi konformasi 3D molekul dan interaksi ligan-protein yang digunakan. Perangkat keras Acer Aspire 5 spesifikasi prosesor Intel Core I3 7th Gen, Ram 4 GB, Windows 10 Home sebagai sistem operasi.. Hasil dari eksperimen ini adalah senyawa aktif dengan SMILES CC1(C2CCC1(C(C2)O)C)C. Protease 7B62 juga berhasil dimurnikan dengan PyMOL. Hasil *docking* didapatkan nilai *Binding Affinity* (kkal/mol) untuk masing-masing RMSD yaitu -7,1 dan -6,9. Sementara RMSD (*Upper Bond*) masing-masing 0 dan 7,91 dan RMSD (*Lower Bond*) masing-masing 0 dan 4,649

ARTICLE HISTORY

Submission: 4 Mei 2022

Received: 23 Mei 2022

Accepted: 4 Juni 2022

Published: 5 Juni 2022

Citation:

Keywords: Pymol; PyRx; 2,5-Bornadieonal, Protease 7B62

1. Pendahuluan

Jahe merupakan salah satu jenis tanaman obat yang berpotensi besar untuk dikembangkan sebagai bumbu, bahan obat tradisional, dan bahan baku minuman serta makanan. Jahe banyak dimanfaatkan sebagai obat anti inflamasi, obat nyeri sendi dan otot, tonikum, serta obat batuk. Jahe juga diandalkan sebagai komoditas ekspor nonmigas dalam bentuk jahe segar, jahe kering, minyak atsiri, dan oleoresin.

Berdasarkan riset ini, *software* PyMOL digunakan untuk menunjukkan tampilan dari struktur yang hendak kita teliti dengan jelas. Aplikasi ini merupakan program visualisasi molekul yang memberikan kualitas gambar 3D yang baik dari molekul yang kita teliti. Pada riset ini dilakukan pemurnian Protease SARS-CoV-2 Omicron varian 7B62.

Investigasi Senyawa Aktif 2,5-Bornadienol dari Tanaman Jahe (*Zingiber Officinale*) dengan Protease Sarscov-2 Varian 7B62

|2

Dalam riset ini dilakukan analisis hubungan protease dengan senyawa aktif menggunakan PyRx dengan metode *Molecular Docking* sehingga menghasilkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Tujuan riset ini adalah untuk menganalisis interaksi senyawa aktif 2,5-Bornadienol dari tanaman Jahe dengan protease Sars-CoV-2 varian 7B62 menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx.

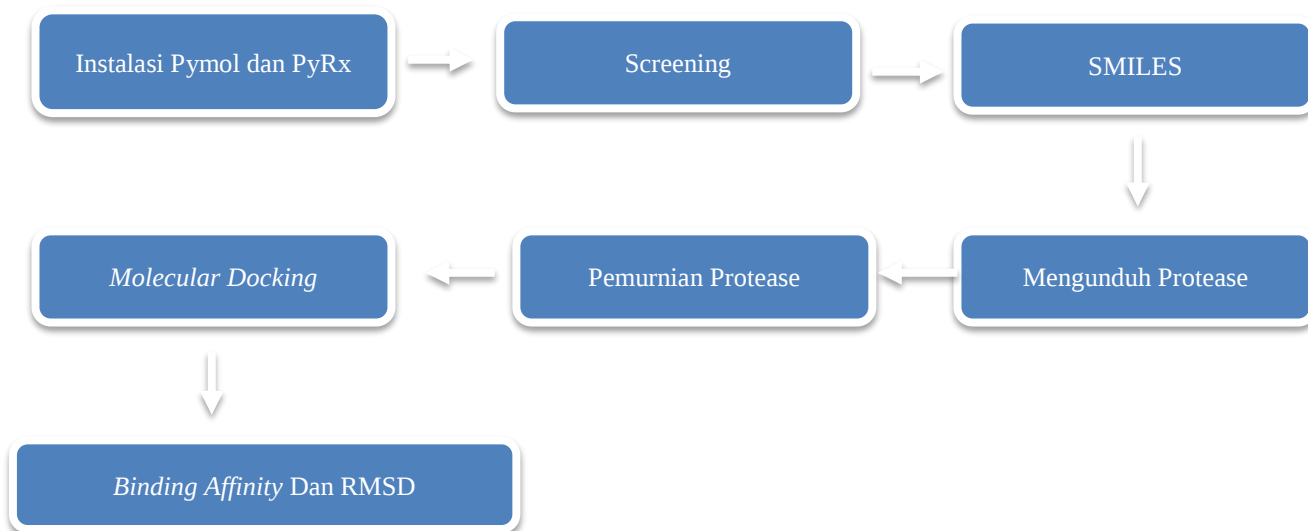
2. Metoda

2.1 Persiapan

Screening molekul aktif menggunakan situs <http://www.phytochem.nal.usda.gov/> . Protease 7B62 protein sarscov_2 dengan format FASTA diperoleh dari PDB (<https://www.rcsb.org>). Struktur 3D dan SMILE molekul diperoleh dari simulasi permodelan Pubchem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) dengan format sdf. Pemurnian protease 7B62 dilakukan melalui software PyMol 2.5.2 version (Schrödinger, Inc., USA) with an academic license. Dan Molecular docking dengan software Pyrex. Perangkat keras yang digunakan berspesifikasi Intel Core I3 7th Gen, RAM 4 GB, Nvidia Geforce MX230 with 2 GB VRAM.

2.2 Pelaksanaan

Pemurnian dilakukan dengan aplikasi PyMOL untuk mensterilkan protease varian 7B62 dari pengotornya. Protease yang sudah steril akan digunakan pada aplikasi PyRx untuk dilakukan metode *Molecular Docking*.



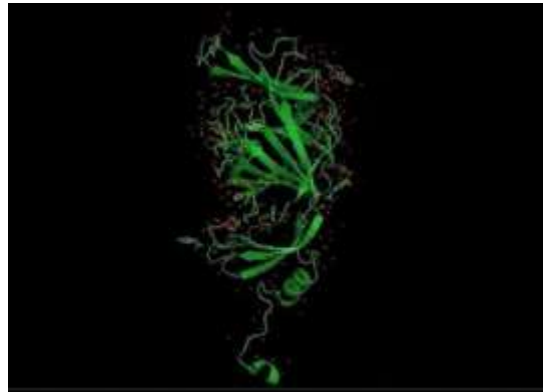
Gambar 1. Skema (Courtesy/Hanifah Putri)

2.3 Evaluasi

Visual gambar Protease 7B62 yang sudah steril diperoleh dari aplikasi PyMOL. Sementara itu, data angka *Binding Affinity* dan RMSD diperoleh dari aplikasi PyRx. Nilai RMSD dan *Binding Affinity* dihubungkan untuk menentukan jarak dan tarikan antara molekul aktif dan protease

3. Hasil dan Pembahasan

Protease yang belum dimurnikan biasanya mengandung pengotor berupa air yang ditandai dengan adanya bercak-bercak merah dan *native ligand*, sehingga dilakukan pemurnian menggunakan aplikasi PyMOL.



Gambar 2. Protease yang belum disterilkan (Courtesy/Hanifah Putri)

Protease yang belum dimurnikan ini biasanya mengandung pengotor berupa air yang ditandai dengan adanya bercak-bercak merah dan *native ligand*



Gambar 3. Protease yang telah disterilkan (Courtesy/Hanifah Putri)

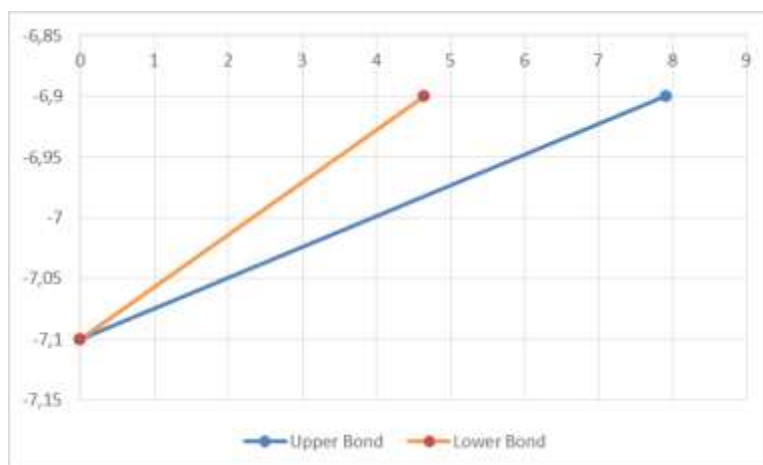
Molecular docking bertujuan meniru peristiwa interaksi suatu molekul ligan dengan protein yang menjadi targetnya pada uji in-vitro. *Molecular Docking* dilakukan dengan menggunakan software Pyrex untuk mendapatkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Protease yang digunakan yaitu 7B62 dengan Senyawa Aktif 2,5-Bornadienol

Investigasi Senyawa Aktif 2,5-Bornadienol dari Tanaman Jahe (*Zingiber Officinale*) dengan Protease Sarscov-2 Varian 7B62

4

Ligand	Binding Affinity	rmsd/ub	rmsd/lb
7B62_steril_5280443_uff_E=233. 26	-7.1	0	0
7B62_steril_5280443_uff_E=233. 26	-6.9	7.91	4.649

Tabel 1. Hasil *Molecular Docking* senyawa aktif 2,5-Bornadienol dengan Protease 7B62



Gambar 3. Grafik RMSD vs *Binding Affinity* (Courtesy/Hanifah Putri)

Gambar 4 menunjukkan hubungan nilai RMSD dengan *Binding Affinity* yang diperoleh dari *Molecular Docking*. Jika nilai RMSD semakin besar akan menyebabkan tarikan antara molekul aktif dan protease 7B62 semakin lemah dan jarak antara kedua molekul tersebut semakin jauh.

4. Kesimpulan

Studi menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx berhasil mendapatkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Hasil *docking* didapatkan nilai *Binding Affinity* (kkal/mol) untuk masing-masing RMSD yaitu -7,1 dan -6,9. Sementara RMSD (*Upper Bond*) masing-masing 0 dan 7.91 dan RMSD (*Lower Bond*) masing-masing 0, dan 4,649 Selanjutnya diperlukan kajian lebih mendalam.